



9. Übung

1. Zeitmittel - statistisches Mittel:

- a) Betrachten Sie einen klassischen eindimensionalen harmonischen Oszillator mit Kreisfrequenz ω und Energie E .

Berechnen Sie durch Zeitmittelung die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$w_1(x) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \delta(x(t) - x) dt$$

im Ortsraum, die angibt, mit welcher Wahrscheinlichkeit der Oszillator während seiner Bewegung im Intervall $[x, x + dx]$ anzutreffen ist. Hängt diese Wahrscheinlichkeitsdichte von den Anfangsbedingungen ab?

- b) Betrachten Sie nun ein Ensemble solcher Oszillatoren, in dem alle Phasenraumpunkte (x, p) mit $H(x, p) = E$ mit gleicher Wahrscheinlichkeit angenommen werden (mikrokanonisches Ensemble), wobei H die Hamiltonfunktion eines solchen Oszillators ist. Berechnen Sie durch Mittelung über dieses Ensemble die Wahrscheinlichkeitsdichte $w_2(x)$ im Ortsraum, die angibt, mit welcher Wahrscheinlichkeit sich einer der Oszillatoren des Ensembles im Intervall $[x, x + dx]$ aufhält.
- c) Überlegen Sie sich, unter welchen Bedingungen sich die in der eindimensionalen Rechnung gefundene Übereinstimmung von $w_1(x)$ und $w_2(x)$ auch bei einer analogen Rechnung für zweidimensionale harmonische Oszillatoren mit Grundfrequenzen ω_1 und ω_2 ergeben würde (ohne die Rechnung auszuführen).

2. Zustandsdichte eines klassischen Systems:

Betrachten Sie ein System aus N ungekoppelten, klassischen harmonischen Oszillatoren ($f = DN =$ Zahl der Freiheitsgrade, $D =$ Ortsraumdimension):

$$H(q, p) = \sum_{\nu=1}^N \sum_{i=1}^D \left(\frac{p_{\nu i}^2}{2m_i} + \frac{m_{\nu} \omega_{\nu i}^2}{2} q_{\nu i}^2 \right) = \sum_{j=1}^f \left(\frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{m_j \omega_j^2}{2} q_j^2 \right) \equiv \sum_{j=1}^f (\tilde{p}_j^2 + \tilde{q}_j^2). \quad (1)$$

Berechnen Sie aus der Anzahl der Zustände $\Sigma^D(E, N) \equiv \Sigma^f(E)$ innerhalb der Energieschale $[E, E + \Delta E]$ bzw. die Zustandsdichte $\Sigma_Q^D(E, N) \equiv \Sigma_Q^f(E)$ des Systems in Abhängigkeit von der Energie E , der Anzahl N und der Dimension D des Ortsraums:

$$\Sigma^D(E, N) \equiv \Sigma^f(E) = \int \prod_{j=1}^f dq_j \int \prod_{j=1}^f dp_j \delta[E - H(q, p)]. \quad (2)$$

Berechnen Sie auch die Zustandsdichte für identische Oszillatoren ($m_{\nu} = m$, $\omega_{\nu i} = \omega_i$).

(Hinweis: Oberfläche einer n -dimensionalen Kugel: $\mathcal{S}_{n-1}(R) = \frac{dV_n(R)}{dR} = \frac{2\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma(\frac{n}{2})} R^{n-1}$.)

3. Mischungsentropie:

Betrachten Sie eine Mischung aus 2 idealen, monoatomaren Gasen mit Atommassen m_1, m_2 und Teilchenzahlen N_1, N_2 im Volumen V . Die Hamilton-Funktion des Systems lautet:

$$H(q, p) = \sum_{k=1}^2 \sum_i^{3N_k} \frac{p_{ki}^2}{2m_k} = \sum_i^{3N_1} \frac{p_{1i}^2}{2m_1} + \sum_i^{3N_2} \frac{p_{2i}^2}{2m_2}. \quad (3)$$

a) Berechnen Sie die Anzahl der Zustände (Zustandssumme)

$$\Sigma_{1,2}(E, V, N_1, N_2) = \int \prod_{i=1}^{3N_1} dq_{1i} \int \prod_{i=1}^{3N_2} dq_{2i} \int \prod_{i=1}^{3N_1} dp_{1i} \int \prod_{i=1}^{3N_2} dp_{2i} \delta[E - H(q, p)]$$

und verifizieren Sie das Resultat:

$$\Sigma_{1,2}(E, V, N_1, N_2) = \frac{V^{N_1+N_2}}{2E} (2m_1 E)^{\frac{3N_1}{2}} (2m_2 E)^{\frac{3N_2}{2}} \mathcal{S}_{3(N_1+N_2)-1} \quad (4)$$

b) Führen Sie Konzentrationen $c_k = \frac{N_k}{N_1+N_2}$ ein und zeigen Sie, daß sich das Resultat (4) auffassen läßt als die Zustandssumme von $N_1 + N_2$ Teilchen im Volumen V mit konzentrationsabhängiger effektiver Atommasse $m^* = m_1^{c_1} m_2^{c_2}$, d.h. $\Sigma_{1,2}(E, V, N_1, N_2) = \Sigma^*(E, V, N_1 + N_2)$.

c) Gehen Sie nun von dem bekannten Zusammenhang $\Sigma_Q(E) = \left(\begin{array}{c} \text{kombinatorischer} \\ \text{Faktor} \end{array} \right) \Sigma(E)$ zwischen Zustandsdichte und Zustandssumme aus und berechnen Sie die zu $\Sigma_{1,2}(E, V, N_1, N_2)$ und $\Sigma^*(E, V, N_1 + N_2)$ gehörigen Zustandsdichten.

Berechnen Sie für $N_1, N_2 \gg 1$ die Mischungsentropie

$$\Delta S_M(E, V, N_1, N_2) = S_{1,2}(E, V, N_1, N_2) - S^*(E, V, N_1 + N_2).$$

Leiten Sie die Mischungsentropie als Funktion der Konzentrationen her:

$$\Delta S_M(E, V, N_1, N_2) = -(N_1 + N_2) k_B (c_1 \ln(c_1) + c_2 \ln(c_2))$$

d) Diskutieren Sie die Mischungsentropie pro Teilchen $\Delta s_M(x) = \Delta S_M(x)/(N_1 + N_2)$ als Funktion von $x = c_1 \in [0, 1]$.

4. Maxwellverteilung:

Betrachten Sie ein Vielteilchensystem mit einer Hamiltonfunktion

$$H(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \dots, \vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots) = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + V(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \dots)$$

bei einer Temperatur T .

a) Leiten Sie die Impulsverteilung $\rho(\vec{p})$ eines herausgegriffenen Teilchens aus dem klassischen kanonischen Ensemble her (*Maxwellverteilung*).

b) Bestimmen Sie daraus die Verteilung $\rho(v)$ des Geschwindigkeitsbetrags $v = \frac{|\vec{p}|}{m}$ und die Verteilung $\rho(\varepsilon)$ der kinetischen Energie $\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$ des Teilchens. Wie groß ist der wahrscheinlichste Geschwindigkeitsbetrag \bar{v} und die wahrscheinlichste kinetische Energie $\bar{\varepsilon}$? Gilt $\bar{\varepsilon} = \frac{1}{2} m \bar{v}^2$?